```
data_lach9f

_publ_section_comment
;
The NBu4 cation has atoms with large U values due to some disorder in
the cation which is not modelled.
;

_audit_creation_method            SHELXL-97
_chemical_name_systematic
;
 ?
;
_chemical_name_common             (NBu4)3[PW9O34(C2H3SiO)3(C2H3Si)]
_chemical_melting_point           ?
_chemical_formula_moiety          ?
_chemical_formula_sum
 'C56 H120 N3 O37 P Si4 W9'
_chemical_formula_weight          3225.53

loop_
 _atom_type_symbol
 _atom_type_description
 _atom_type_scat_dispersion_real
 _atom_type_scat_dispersion_imag
 _atom_type_scat_source
 'C'  'C'   0.0181   0.0091
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'H'  'H'   0.0000   0.0000
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'N'  'N'   0.0311   0.0180
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'O'  'O'   0.0492   0.0322
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Si'  'Si'   0.2541   0.3302
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'P'  'P'   0.2955   0.4335
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'W'  'W'  -5.4734   5.5774
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting            Orthorhombic
_symmetry_space_group_name_H-M    'Pca21'

loop_
 _symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'
 '-x, -y, z+1/2'
 '-x+1/2, y, z+1/2'
 'x+1/2, -y, z'

_cell_length_a                    26.508(7)
_cell_length_b                    14.434(4)
_cell_length_c                    24.426(7)
_cell_angle_alpha                 90.00
_cell_angle_beta                  90.00
_cell_angle_gamma                 90.00
_cell_volume                      9346(4)
_cell_formula_units_Z             4
_cell_measurement_temperature     293(2)
_cell_measurement_reflns_used     ?
_cell_measurement_theta_min       3.1
_cell_measurement_theta_max       70.4

_exptl_crystal_description        ?
```

```
_exptl_crystal_colour             Colourless
_exptl_crystal_size_max           0.14
_exptl_crystal_size_mid           0.10
_exptl_crystal_size_min           0.06
_exptl_crystal_density_meas       ?
_exptl_crystal_density_diffrn     2.292
_exptl_crystal_density_method     'not measured'
_exptl_crystal_F_000              6040
_exptl_absorpt_coefficient_mu     21.158
_exptl_absorpt_correction_type    Multi-scan
_exptl_absorpt_correction_T_min   0.1557
_exptl_absorpt_correction_T_max   0.3633
_exptl_absorpt_process_details    'Sadabs'

_exptl_special_details
;
 ?
;

_diffrn_ambient_temperature       293(2)
_diffrn_radiation_wavelength      1.54178
_diffrn_radiation_type            CuK\a
_diffrn_radiation_source          'fine-focus sealed tube'
_diffrn_radiation_monochromator   graphite
_diffrn_measurement_device_type   'Bruker Smart 6000 CCD'
_diffrn_measurement_method        'CCD scans'
_diffrn_detector_area_resol_mean  ?
_diffrn_standards_number          ?
_diffrn_standards_interval_count  ?
_diffrn_standards_interval_time   ?
_diffrn_standards_decay_%         ?
_diffrn_reflns_number             57182
_diffrn_reflns_av_R_equivalents   0.0604
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI     0.0612
_diffrn_reflns_limit_h_min        -32
_diffrn_reflns_limit_h_max        31
_diffrn_reflns_limit_k_min        -17
_diffrn_reflns_limit_k_max        17
_diffrn_reflns_limit_l_min        -28
_diffrn_reflns_limit_l_max        29
_diffrn_reflns_theta_min          3.06
_diffrn_reflns_theta_max          70.41
_reflns_number_total              16454
_reflns_number_gt                 12387
_reflns_threshold_expression      >2sigma(I)

_computing_data_collection        SMART
_computing_cell_refinement        SAINTPLUS
_computing_data_reduction         SAINTPLUS
_computing_structure_solution     SHELXTL
_computing_structure_refinement   'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'


_refine_special_details
;
 Refinement of F^2^ against ALL reflections.  The weighted R-factor
wR and
 goodness of fit S are based on F^2^, conventional R-factors R are
based
 on F, with F set to zero for negative F^2^. The threshold expression
of
 F^2^ > 2sigma(F^2^) is used only for calculating R-factors(gt) etc.
and is
 not relevant to the choice of reflections for refinement.  R-factors
based
 on F^2^ are statistically about twice as large as those based on F,
```

```
and R-
 factors based on ALL data will be even larger.
;

_refine_ls_structure_factor_coef  Fsqd
_refine_ls_matrix_type            fullcycle
_refine_ls_weighting_scheme       calc
_refine_ls_weighting_details
 'calc w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0501P)^2^+0.0000P] where P=(Fo^2^+2Fc^2
^)/3'
_atom_sites_solution_primary      direct
_atom_sites_solution_secondary    difmap
_atom_sites_solution_hydrogens    geom
_refine_ls_hydrogen_treatment     constr
_refine_ls_extinction_method      none
_refine_ls_extinction_coef        ?
_refine_ls_abs_structure_details
 'Flack H D (1983), Acta Cryst. A39, 876-881'
_refine_ls_abs_structure_Flack    -0.046(14)
_refine_ls_number_reflns          16454
_refine_ls_number_parameters      1007
_refine_ls_number_restraints      544
_refine_ls_R_factor_all           0.0678
_refine_ls_R_factor_gt            0.0442
_refine_ls_wR_factor_ref          0.1073
_refine_ls_wR_factor_gt           0.0949
_refine_ls_goodness_of_fit_ref    1.004
_refine_ls_restrained_S_all       0.998
_refine_ls_shift/su_max           0.096
_refine_ls_shift/su_mean          0.014

loop_
 _atom_site_label
 _atom_site_type_symbol
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_U_iso_or_equiv
 _atom_site_adp_type
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_symmetry_multiplicity
 _atom_site_calc_flag
 _atom_site_refinement_flags
 _atom_site_disorder_assembly
 _atom_site_disorder_group
C52 C 0.5289(8) 0.3601(15) 0.4417(11) 0.123(7) Uani 1 1 d DU . .
H52 H 0.5621 0.3514 0.4305 0.148 Uiso 1 1 calc R . .
C52A C 0.5289(8) 0.3601(15) 0.4417(11) 0.113(16) Uani 0.00 1 d PDU .
.
H52A H 0.5393 0.4137 0.4238 0.135 Uiso 0.00 1 calc PR . .
C53 C 0.5213(17) 0.425(2) 0.4783(17) 0.15(2) Uani 0.60(3) 1 d PDU . .
H53A H 0.4889 0.4366 0.4909 0.183 Uiso 0.60(3) 1 calc PR . .
H53B H 0.5484 0.4591 0.4916 0.183 Uiso 0.60(3) 1 calc PR . .
C53A C 0.548(2) 0.339(4) 0.4898(17) 0.127(17) Uani 0.40(3) 1 d PDU .
.
H53C H 0.5378 0.2852 0.5078 0.153 Uiso 0.40(3) 1 calc PR . .
H53D H 0.5721 0.3773 0.5058 0.153 Uiso 0.40(3) 1 calc PR . .
C54 C 0.5770(7) -0.0332(17) 0.2567(10) 0.118(7) Uani 1 1 d U . .
H54 H 0.5920 -0.0055 0.2264 0.142 Uiso 1 1 calc R . .
C55 C 0.6026(8) -0.099(2) 0.2824(14) 0.161(11) Uani 1 1 d U . .
H55A H 0.5887 -0.1276 0.3128 0.194 Uiso 1 1 calc R . .
H55B H 0.6344 -0.1154 0.2700 0.194 Uiso 1 1 calc R . .
C56 C 0.4534(11) 0.3827(17) 0.1593(9) 0.137(8) Uani 1 1 d DU . .
H56 H 0.4759 0.4189 0.1793 0.164 Uiso 1 1 calc R . .
C57 C 0.4573(18) 0.408(3) 0.1101(12) 0.279(19) Uani 1 1 d DU . .
H57A H 0.4377 0.3799 0.0832 0.335 Uiso 1 1 calc R . .
```

H57B H 0.4797 0.4550 0.1006 0.335 Uiso 1 1 calc R . .
C58 C 0.5712(8) 0.2792(18) 0.2651(11) 0.132(8) Uani 1 1 d U . .
H58 H 0.5800 0.3288 0.2875 0.159 Uiso 1 1 calc R . .
C59 C 0.5986(14) 0.267(4) 0.2355(19) 0.30(2) Uani 1 1 d U . .
H59A H 0.5945 0.2194 0.2104 0.363 Uiso 1 1 calc R . .
H59B H 0.6273 0.3042 0.2342 0.363 Uiso 1 1 calc R . .
C61 C 0.5452(6) -0.0122(14) 0.5285(7) 0.084(4) Uani 1 1 d U . .
H61A H 0.5204 -0.0380 0.5036 0.101 Uiso 1 1 calc R . .
H61B H 0.5364 0.0522 0.5345 0.101 Uiso 1 1 calc R . .
C62 C 0.5413(9) -0.066(2) 0.5853(11) 0.148(10) Uani 1 1 d U . .
H62A H 0.5558 -0.1268 0.5809 0.177 Uiso 1 1 calc R . .
H62B H 0.5614 -0.0327 0.6122 0.177 Uiso 1 1 calc R . .
C63 C 0.4882(9) -0.0757(19) 0.6073(11) 0.141(9) Uani 1 1 d DU . .
H63A H 0.4711 -0.0164 0.6052 0.170 Uiso 1 1 calc R . .
H63B H 0.4896 -0.0940 0.6455 0.170 Uiso 1 1 calc R . .
C64 C 0.4586(12) -0.147(3) 0.575(2) 0.28(3) Uani 1 1 d DU . .
H64A H 0.4252 -0.1523 0.5903 0.418 Uiso 1 1 calc R . .
H64B H 0.4753 -0.2060 0.5776 0.418 Uiso 1 1 calc R . .
H64C H 0.4564 -0.1284 0.5377 0.418 Uiso 1 1 calc R . .
C65 C 0.6350(7) 0.0323(14) 0.5358(8) 0.097(5) Uani 1 1 d U . .
H65A H 0.6389 -0.0016 0.5699 0.116 Uiso 1 1 calc R . .
H65B H 0.6669 0.0287 0.5165 0.116 Uiso 1 1 calc R . .
C66 C 0.6250(9) 0.1294(14) 0.5489(10) 0.127(8) Uani 1 1 d DU . .
H66A H 0.5975 0.1335 0.5750 0.152 Uiso 1 1 calc R . .
H66B H 0.6151 0.1623 0.5160 0.152 Uiso 1 1 calc R . .
C67 C 0.6733(11) 0.174(2) 0.5734(15) 0.206(16) Uani 1 1 d DU . .
H67A H 0.6796 0.1499 0.6098 0.247 Uiso 1 1 calc R . .
H67B H 0.7023 0.1604 0.5505 0.247 Uiso 1 1 calc R . .
C68 C 0.665(2) 0.2774(18) 0.576(2) 0.42(5) Uani 1 1 d DU . .
H68A H 0.6948 0.3065 0.5910 0.624 Uiso 1 1 calc R . .
H68B H 0.6368 0.2906 0.5992 0.624 Uiso 1 1 calc R . .
H68C H 0.6590 0.3009 0.5400 0.624 Uiso 1 1 calc R . .
C69 C 0.5895(6) 0.0332(13) 0.4470(7) 0.080(4) Uani 1 1 d U . .
H69A H 0.5623 0.0039 0.4268 0.096 Uiso 1 1 calc R . .
H69B H 0.5797 0.0969 0.4538 0.096 Uiso 1 1 calc R . .
C70 C 0.6354(8) 0.0334(16) 0.4119(9) 0.110(6) Uani 1 1 d U . .
H70A H 0.6396 -0.0273 0.3955 0.132 Uiso 1 1 calc R . .
H70B H 0.6648 0.0458 0.4344 0.132 Uiso 1 1 calc R . .
C71 C 0.6318(9) 0.1060(16) 0.3670(11) 0.137(8) Uani 1 1 d DU . .
H71A H 0.6495 0.0841 0.3347 0.164 Uiso 1 1 calc R . .
H71B H 0.5967 0.1152 0.3572 0.164 Uiso 1 1 calc R . .
C72 C 0.6544(11) 0.1972(16) 0.3854(12) 0.160(11) Uani 1 1 d DU . .
H72A H 0.6510 0.2421 0.3566 0.240 Uiso 1 1 calc R . .
H72B H 0.6894 0.1886 0.3938 0.240 Uiso 1 1 calc R . .
H72C H 0.6370 0.2188 0.4174 0.240 Uiso 1 1 calc R . .
C73 C 0.6131(7) -0.1160(11) 0.4938(10) 0.112(6) Uani 1 1 d DU . .
H73A H 0.6177 -0.1444 0.5294 0.135 Uiso 1 1 calc R . .
H73B H 0.6456 -0.1152 0.4756 0.135 Uiso 1 1 calc R . .
C74 C 0.5762(9) -0.1757(11) 0.4599(12) 0.143(9) Uani 1 1 d DU . .
H74A H 0.5784 -0.1600 0.4214 0.172 Uiso 1 1 calc R . .
H74B H 0.5418 -0.1662 0.4721 0.172 Uiso 1 1 calc R . .
C75 C 0.5927(9) -0.2776(11) 0.4695(14) 0.171(12) Uani 1 1 d DU . .
H75A H 0.6274 -0.2865 0.4580 0.205 Uiso 1 1 calc R . .
H75B H 0.5901 -0.2932 0.5081 0.205 Uiso 1 1 calc R . .
C76 C 0.5574(14) -0.3386(16) 0.4358(18) 0.26(2) Uani 1 1 d DU . .
H76A H 0.5667 -0.4024 0.4404 0.384 Uiso 1 1 calc R . .
H76B H 0.5601 -0.3219 0.3978 0.384 Uiso 1 1 calc R . .
H76C H 0.5233 -0.3297 0.4479 0.384 Uiso 1 1 calc R . .
C78 C 0.7931(6) 0.4378(12) 0.3734(10) 0.105(5) Uani 1 1 d DU . .
H78A H 0.8078 0.4832 0.3980 0.126 Uiso 1 1 calc R . .
H78B H 0.7839 0.4703 0.3401 0.126 Uiso 1 1 calc R . .
C79 C 0.7451(8) 0.4014(14) 0.3995(10) 0.126(7) Uani 1 1 d DU . .
H79A H 0.7531 0.3662 0.4322 0.151 Uiso 1 1 calc R . .
H79B H 0.7274 0.3611 0.3742 0.151 Uiso 1 1 calc R . .
C80 C 0.7118(10) 0.485(2) 0.4143(16) 0.211(16) Uani 1 1 d DU . .
H80A H 0.7310 0.5260 0.4381 0.254 Uiso 1 1 calc R . .

H80B H 0.7046 0.5194 0.3810 0.254 Uiso 1 1 calc R . .
C81 C 0.6618(12) 0.463(3) 0.442(2) 0.29(3) Uani 1 1 d DU . .
H81A H 0.6444 0.5191 0.4511 0.442 Uiso 1 1 calc R . .
H81B H 0.6683 0.4288 0.4756 0.442 Uiso 1 1 calc R . .
H81C H 0.6414 0.4257 0.4184 0.442 Uiso 1 1 calc R . .
C82 C 0.8495(10) 0.3129(11) 0.4091(10) 0.116(6) Uani 1 1 d U . .
H82A H 0.8742 0.2667 0.3985 0.139 Uiso 1 1 calc R . .
H82B H 0.8199 0.2801 0.4221 0.139 Uiso 1 1 calc R . .
C83 C 0.8714(12) 0.3683(16) 0.4572(11) 0.167(11) Uani 1 1 d DU . .
H83A H 0.8510 0.4233 0.4631 0.200 Uiso 1 1 calc R . .
H83B H 0.9053 0.3881 0.4482 0.200 Uiso 1 1 calc R . .
C84 C 0.8725(18) 0.310(2) 0.5106(12) 0.24(2) Uani 1 1 d DU . .
H84A H 0.8398 0.2818 0.5171 0.289 Uiso 1 1 calc R . .
H84B H 0.8974 0.2606 0.5076 0.289 Uiso 1 1 calc R . .
C85 C 0.8863(19) 0.375(3) 0.5579(16) 0.27(2) Uani 1 1 d DU . .
H85A H 0.8878 0.3411 0.5916 0.404 Uiso 1 1 calc R . .
H85B H 0.8612 0.4231 0.5609 0.404 Uiso 1 1 calc R . .
H85C H 0.9186 0.4031 0.5508 0.404 Uiso 1 1 calc R . .
C86 C 0.8769(8) 0.4246(11) 0.3374(11) 0.116(7) Uani 1 1 d U . .
H86A H 0.8877 0.4664 0.3662 0.139 Uiso 1 1 calc R . .
H86B H 0.8642 0.4621 0.3075 0.139 Uiso 1 1 calc R . .
C87 C 0.9232(10) 0.3701(15) 0.3169(13) 0.158(11) Uani 1 1 d DU . .
H87A H 0.9406 0.3439 0.3483 0.190 Uiso 1 1 calc R . .
H87B H 0.9117 0.3191 0.2943 0.190 Uiso 1 1 calc R . .
C88 C 0.9605(10) 0.4279(18) 0.2841(16) 0.198(14) Uani 1 1 d DU . .
H88A H 0.9830 0.3868 0.2642 0.237 Uiso 1 1 calc R . .
H88B H 0.9422 0.4647 0.2575 0.237 Uiso 1 1 calc R . .
C89 C 0.9914(19) 0.491(4) 0.3197(19) 0.32(3) Uani 1 1 d DU . .
H89A H 1.0140 0.5266 0.2972 0.487 Uiso 1 1 calc R . .
H89B H 1.0105 0.4550 0.3453 0.487 Uiso 1 1 calc R . .
H89C H 0.9694 0.5324 0.3392 0.487 Uiso 1 1 calc R . .
C90 C 0.8143(10) 0.2965(11) 0.3176(9) 0.118(6) Uani 1 1 d U . .
H90A H 0.7868 0.2626 0.3345 0.142 Uiso 1 1 calc R . .
H90B H 0.8407 0.2523 0.3089 0.142 Uiso 1 1 calc R . .
C91 C 0.7948(12) 0.3417(16) 0.2629(10) 0.169(12) Uani 1 1 d DU . .
H91A H 0.7744 0.3950 0.2727 0.203 Uiso 1 1 calc R . .
H91B H 0.8240 0.3649 0.2432 0.203 Uiso 1 1 calc R . .
C92 C 0.7647(19) 0.284(2) 0.2238(17) 0.31(3) Uani 1 1 d DU . .
H92A H 0.7423 0.2439 0.2442 0.374 Uiso 1 1 calc R . .
H92B H 0.7873 0.2457 0.2024 0.374 Uiso 1 1 calc R . .
C93 C 0.7339(14) 0.345(3) 0.1856(16) 0.28(2) Uani 1 1 d DU . .
H93A H 0.7097 0.3074 0.1665 0.413 Uiso 1 1 calc R . .
H93B H 0.7559 0.3743 0.1597 0.413 Uiso 1 1 calc R . .
H93C H 0.7166 0.3914 0.2065 0.413 Uiso 1 1 calc R . .
C95 C 0.6099(9) -0.277(3) 0.1130(10) 0.194(11) Uani 1 1 d DU . .
H95A H 0.6028 -0.3431 0.1103 0.233 Uiso 1 1 calc R . .
H95B H 0.6066 -0.2514 0.0765 0.233 Uiso 1 1 calc R . .
C96 C 0.5693(11) -0.233(3) 0.1497(14) 0.273(17) Uani 1 1 d DU . .
H96A H 0.5663 -0.2674 0.1836 0.328 Uiso 1 1 calc R . .
H96B H 0.5787 -0.1697 0.1586 0.328 Uiso 1 1 calc R . .
C97 C 0.5192(10) -0.234(3) 0.1192(16) 0.254(17) Uani 1 1 d DU . .
H97A H 0.5251 -0.2375 0.0801 0.304 Uiso 1 1 calc R . .
H97B H 0.5007 -0.1772 0.1267 0.304 Uiso 1 1 calc R . .
C98 C 0.4886(13) -0.318(2) 0.138(2) 0.32(3) Uani 1 1 d DU . .
H98A H 0.4584 -0.3223 0.1166 0.482 Uiso 1 1 calc R . .
H98B H 0.4798 -0.3103 0.1760 0.482 Uiso 1 1 calc R . .
H98C H 0.5084 -0.3728 0.1336 0.482 Uiso 1 1 calc R . .
C99 C 0.6684(12) -0.291(2) 0.1897(10) 0.182(11) Uani 1 1 d DU . .
H99A H 0.6498 -0.2438 0.2097 0.218 Uiso 1 1 calc R . .
H99B H 0.7036 -0.2827 0.1995 0.218 Uiso 1 1 calc R . .
C100 C 0.6525(15) -0.383(2) 0.2136(12) 0.243(18) Uani 1 1 d DU . .
H10A H 0.6795 -0.4279 0.2106 0.291 Uiso 1 1 calc R . .
H10B H 0.6229 -0.4066 0.1949 0.291 Uiso 1 1 calc R . .
C102 C 0.630(2) -0.455(3) 0.3014(16) 0.34(3) Uani 1 1 d DU . .
H10C H 0.6230 -0.4475 0.3396 0.517 Uiso 1 1 calc R . .
H10D H 0.6597 -0.4935 0.2972 0.517 Uiso 1 1 calc R . .

H10E H 0.6021 -0.4837 0.2835 0.517 Uiso 1 1 calc R . .
C103 C 0.6403(19) -0.361(2) 0.2759(12) 0.29(2) Uani 1 1 d DU . .
H10F H 0.6687 -0.3308 0.2935 0.354 Uiso 1 1 calc R . .
H10G H 0.6109 -0.3215 0.2790 0.354 Uiso 1 1 calc R . .
C104 C 0.6926(14) -0.326(2) 0.0950(14) 0.205(12) Uani 1 1 d DU . .
H10H H 0.6779 -0.3870 0.0979 0.246 Uiso 1 1 calc R . .
H10I H 0.6864 -0.3045 0.0579 0.246 Uiso 1 1 calc R . .
C105 C 0.7442(18) -0.336(3) 0.101(2) 0.288(18) Uani 1 1 d DU . .
H10J H 0.7509 -0.3608 0.1368 0.345 Uiso 1 1 calc R . .
H10K H 0.7594 -0.2747 0.0992 0.345 Uiso 1 1 calc R . .
C106 C 0.7709(14) -0.397(3) 0.0588(18) 0.297(19) Uani 1 1 d DU . .
H10L H 0.7806 -0.3589 0.0279 0.356 Uiso 1 1 calc R . .
H10M H 0.7470 -0.4427 0.0455 0.356 Uiso 1 1 calc R . .
C107 C 0.8180(17) -0.448(3) 0.080(2) 0.30(2) Uani 1 1 d DU . .
H10N H 0.8326 -0.4835 0.0501 0.445 Uiso 1 1 calc R . .
H10O H 0.8087 -0.4896 0.1087 0.445 Uiso 1 1 calc R . .
H10P H 0.8422 -0.4043 0.0927 0.445 Uiso 1 1 calc R . .
C108 C 0.6924(16) -0.171(2) 0.1397(13) 0.205(13) Uani 1 1 d DU . .
H10Q H 0.6807 -0.1414 0.1731 0.246 Uiso 1 1 calc R . .
H10R H 0.7285 -0.1812 0.1430 0.246 Uiso 1 1 calc R . .
C109 C 0.6817(15) -0.110(2) 0.0916(16) 0.255(15) Uani 1 1 d DU . .
H10S H 0.6458 -0.0968 0.0898 0.306 Uiso 1 1 calc R . .
H10T H 0.6913 -0.1416 0.0581 0.306 Uiso 1 1 calc R . .
C110 C 0.7113(11) -0.020(2) 0.0970(17) 0.224(14) Uani 1 1 d DU . .
H11A H 0.7363 -0.0258 0.1258 0.268 Uiso 1 1 calc R . .
H11B H 0.7288 -0.0067 0.0630 0.268 Uiso 1 1 calc R . .
C111 C 0.6762(12) 0.058(2) 0.1102(14) 0.213(14) Uani 1 1 d DU . .
H11C H 0.6950 0.1147 0.1133 0.319 Uiso 1 1 calc R . .
H11D H 0.6594 0.0454 0.1442 0.319 Uiso 1 1 calc R . .
H11E H 0.6516 0.0640 0.0816 0.319 Uiso 1 1 calc R . .
N60 N 0.5951(5) -0.0157(9) 0.5017(6) 0.076(2) Uani 1 1 d U . .
N77 N 0.8348(6) 0.3662(8) 0.3587(8) 0.100(3) Uani 1 1 d U . .
N94 N 0.6644(8) -0.2656(16) 0.1312(7) 0.138(5) Uani 1 1 d U . .
O11 O 0.3936(3) 0.1725(5) 0.3765(3) 0.0475(16) Uani 1 1 d U . .
O12 O 0.4093(3) 0.0408(6) 0.3130(4) 0.0500(17) Uani 1 1 d U . .
O13 O 0.3659(3) 0.1831(5) 0.2781(4) 0.0528(17) Uani 1 1 d U . .
O14 O 0.4317(4) 0.0852(8) 0.5283(4) 0.079(3) Uani 1 1 d U . .
O15 O 0.4462(3) 0.0157(6) 0.4237(4) 0.062(2) Uani 1 1 d U . .
O16 O 0.4606(4) -0.1727(7) 0.4061(5) 0.079(3) Uani 1 1 d U . .
O17 O 0.4215(4) -0.1376(6) 0.3031(4) 0.068(2) Uani 1 1 d U . .
O18 O 0.4002(5) -0.1523(8) 0.1921(5) 0.092(3) Uani 1 1 d U . .
O19 O 0.3822(4) 0.0389(7) 0.1982(4) 0.071(2) Uani 1 1 d U . .
O20 O 0.3184(5) 0.1282(8) 0.1244(5) 0.096(3) Uani 1 1 d U . .
O21 O 0.3033(4) 0.2543(7) 0.2071(4) 0.073(2) Uani 1 1 d U . .
O22 O 0.2812(5) 0.4180(6) 0.2633(4) 0.083(3) Uani 1 1 d U . .
O23 O 0.3451(4) 0.3468(6) 0.3449(4) 0.062(2) Uani 1 1 d U . .
O24 O 0.3371(5) 0.3961(7) 0.4544(4) 0.079(3) Uani 1 1 d U . .
O25 O 0.3790(4) 0.2267(6) 0.4767(4) 0.064(2) Uani 1 1 d U . .
O26 O 0.3220(3) 0.0775(5) 0.3422(3) 0.0488(16) Uani 1 1 d U . .
O27 O 0.3539(4) 0.0495(6) 0.4557(4) 0.0627(19) Uani 1 1 d U . .
O28 O 0.3695(4) -0.0860(6) 0.3900(4) 0.068(2) Uani 1 1 d U . .
O29 O 0.3348(4) -0.0717(6) 0.2645(4) 0.069(2) Uani 1 1 d U . .
O30 O 0.2891(3) 0.0741(6) 0.2290(4) 0.067(2) Uani 1 1 d U . .
O31 O 0.2690(3) 0.2464(6) 0.3108(4) 0.063(2) Uani 1 1 d U . .
O32 O 0.2988(3) 0.2355(6) 0.4122(4) 0.0595(18) Uani 1 1 d U . .
O33 O 0.2899(4) -0.1053(8) 0.4639(6) 0.098(3) Uani 1 1 d U . .
O34 O 0.2751(4) -0.0753(6) 0.3535(5) 0.077(2) Uani 1 1 d U . .
O35 O 0.2271(5) -0.0791(8) 0.2510(6) 0.104(4) Uani 1 1 d U . .
O36 O 0.2280(4) 0.0765(7) 0.3174(5) 0.079(2) Uani 1 1 d U . .
O37 O 0.1938(4) 0.2107(8) 0.3910(5) 0.093(3) Uani 1 1 d U . .
O38 O 0.2569(4) 0.0642(7) 0.4220(4) 0.071(2) Uani 1 1 d U . .
O39 O 0.4741(4) 0.1912(7) 0.4465(4) 0.073(2) Uani 1 1 d U . .
O40 O 0.5005(4) -0.0382(7) 0.3371(4) 0.070(2) Uani 1 1 d U . .
O41 O 0.4708(4) -0.0295(7) 0.2336(5) 0.078(2) Uani 1 1 d U . .
O42 O 0.4288(4) 0.3414(6) 0.4084(4) 0.073(2) Uani 1 1 d U . .
O43 O 0.3793(4) 0.3610(6) 0.2415(4) 0.077(2) Uani 1 1 d U . .

```
O44 O 0.3973(4) 0.2195(8) 0.1746(4) 0.079(2) Uani 1 1 d U . .
O45 O 0.5127(4) 0.1164(8) 0.2812(5) 0.086(3) Uani 1 1 d U . .
O46 O 0.4673(4) 0.2732(8) 0.2462(5) 0.090(3) Uani 1 1 d U . .
O47 O 0.4999(4) 0.2601(8) 0.3484(5) 0.090(3) Uani 1 1 d U . .
Si48 Si 0.48122(17) 0.2838(3) 0.4095(2) 0.0799(12) Uani 1 1 d U . .
Si49 Si 0.51295(15) 0.0075(3) 0.2770(2) 0.0729(11) Uani 1 1 d U . .
Si50 Si 0.4234(2) 0.3070(3) 0.2071(2) 0.0836(13) Uani 1 1 d U . .
Si51 Si 0.51062(17) 0.2301(3) 0.2853(2) 0.0828(12) Uani 1 1 d U . .
P10 P 0.37478(11) 0.1202(2) 0.32722(13) 0.0368(6) Uani 1 1 d U . .
W1 W 0.41642(2) 0.11441(4) 0.46330(3) 0.05718(16) Uani 1 1 d U . .
W2 W 0.43922(2) -0.08057(4) 0.37093(3) 0.05978(16) Uani 1 1 d U . .
W3 W 0.40200(3) -0.06806(5) 0.23995(3) 0.06457(18) Uani 1 1 d U . .
W4 W 0.33997(3) 0.14302(5) 0.18937(3) 0.06852(19) Uani 1 1 d U . .
W5 W 0.31691(3) 0.32099(4) 0.27441(3) 0.06260(17) Uani 1 1 d U . .
W6 W 0.35840(3) 0.30618(4) 0.41785(3) 0.05784(16) Uani 1 1 d U . .
W7 W 0.25033(2) 0.16517(5) 0.37066(3) 0.06406(17) Uani 1 1 d U . .
W8 W 0.30881(3) -0.02874(4) 0.41612(3) 0.06418(18) Uani 1 1 d U . .
W9 W 0.27144(3) -0.01382(5) 0.28344(3) 0.0703(2) Uani 1 1 d U . .

loop_
 _atom_site_aniso_label
 _atom_site_aniso_U_11
 _atom_site_aniso_U_22
 _atom_site_aniso_U_33
 _atom_site_aniso_U_23
 _atom_site_aniso_U_13
 _atom_site_aniso_U_12
C52 0.093(10) 0.114(13) 0.162(19) -0.048(13) -0.015(12) -0.027(10)
C52A 0.10(2) 0.11(4) 0.13(3) -0.023(17) -0.02(3) -0.04(3)
C53 0.16(4) 0.10(3) 0.20(5) -0.06(3) -0.05(3) -0.02(2)
C53A 0.12(2) 0.13(2) 0.13(2) -0.030(17) -0.033(16) -0.036(18)
C54 0.058(7) 0.163(16) 0.134(17) -0.026(14) 0.030(8) 0.013(10)
C55 0.065(12) 0.22(3) 0.20(3) -0.05(2) -0.034(15) 0.054(13)
C56 0.19(2) 0.127(15) 0.098(13) 0.019(10) 0.038(12) -0.037(13)
C57 0.36(4) 0.32(3) 0.16(2) 0.11(2) 0.07(3) -0.07(3)
C58 0.088(8) 0.165(17) 0.144(19) 0.057(17) 0.020(10) -0.045(12)
C59 0.18(3) 0.46(4) 0.26(3) 0.00(3) 0.13(2) -0.12(3)
C61 0.072(7) 0.110(13) 0.070(9) -0.010(8) -0.010(6) 0.019(8)
C62 0.095(12) 0.21(3) 0.139(18) 0.079(19) -0.004(11) -0.021(15)
C63 0.119(15) 0.17(2) 0.14(2) 0.023(16) 0.044(14) 0.020(15)
C64 0.12(2) 0.28(5) 0.44(8) -0.06(4) -0.01(3) -0.04(2)
C65 0.084(9) 0.133(11) 0.073(11) 0.006(10) -0.032(9) 0.000(10)
C66 0.145(18) 0.136(12) 0.099(16) -0.020(14) -0.044(14) -0.005(13)
C67 0.23(3) 0.21(2) 0.17(3) -0.01(2) -0.09(3) -0.09(3)
C68 0.59(10) 0.18(2) 0.47(9) 0.05(5) -0.35(8) -0.14(4)
C69 0.069(9) 0.099(11) 0.072(8) -0.002(7) -0.018(6) 0.003(9)
C70 0.094(12) 0.147(15) 0.090(12) 0.025(12) -0.003(9) -0.004(13)
C71 0.101(15) 0.166(18) 0.144(19) 0.068(15) -0.017(13) -0.032(15)
C72 0.17(3) 0.131(15) 0.18(3) 0.031(17) -0.03(2) 0.007(16)
C73 0.072(11) 0.092(8) 0.17(2) 0.006(9) 0.001(11) 0.026(8)
C74 0.16(2) 0.089(10) 0.18(3) -0.030(13) -0.005(17) 0.016(13)
C75 0.14(2) 0.093(10) 0.28(4) -0.012(18) 0.02(2) 0.017(13)
C76 0.28(4) 0.118(16) 0.36(4) -0.08(2) -0.01(3) -0.02(2)
C78 0.104(11) 0.075(10) 0.137(17) 0.002(9) 0.005(11) 0.006(7)
C79 0.129(13) 0.119(15) 0.13(2) -0.001(14) 0.007(13) -0.032(11)
C80 0.15(2) 0.24(3) 0.24(4) 0.00(3) 0.06(2) 0.06(2)
C81 0.19(3) 0.27(5) 0.42(8) 0.10(5) 0.12(4) 0.06(3)
C82 0.155(19) 0.051(9) 0.142(11) 0.007(7) 0.018(11) 0.016(9)
C83 0.22(3) 0.088(14) 0.191(17) 0.017(13) -0.08(2) 0.016(17)
C84 0.38(6) 0.16(3) 0.183(19) 0.029(16) -0.10(3) 0.09(3)
C85 0.33(4) 0.29(4) 0.179(18) -0.03(2) -0.04(3) 0.07(3)
C86 0.104(11) 0.052(9) 0.19(2) 0.014(10) 0.020(12) 0.003(7)
C87 0.163(17) 0.103(15) 0.21(3) 0.049(17) 0.064(18) 0.061(12)
C88 0.12(2) 0.13(2) 0.34(5) 0.02(2) 0.07(2) -0.003(15)
C89 0.30(4) 0.33(4) 0.35(5) 0.02(3) -0.03(4) -0.10(3)
C90 0.17(2) 0.043(8) 0.143(13) 0.000(7) 0.021(12) -0.019(10)
```

C91 0.30(4) 0.103(16) 0.108(15) 0.001(11) 0.009(16) -0.039(19)
C92 0.48(8) 0.23(4) 0.23(4) 0.05(3) -0.14(4) -0.15(4)
C93 0.23(4) 0.36(6) 0.24(4) 0.08(4) -0.04(3) -0.12(4)
C95 0.150(9) 0.35(4) 0.078(15) 0.04(2) -0.029(10) -0.047(13)
C96 0.171(15) 0.38(4) 0.27(3) 0.05(3) 0.010(19) 0.04(2)
C97 0.170(14) 0.33(4) 0.26(4) 0.12(3) 0.01(2) -0.03(2)
C98 0.22(3) 0.17(3) 0.57(10) 0.04(4) 0.09(5) 0.03(2)
C99 0.20(3) 0.25(3) 0.095(11) 0.012(15) -0.060(14) -0.03(2)
C100 0.23(4) 0.24(3) 0.25(3) 0.09(2) 0.07(4) 0.08(3)
C102 0.35(5) 0.39(4) 0.30(3) 0.14(3) 0.06(4) -0.02(4)
C103 0.30(4) 0.38(4) 0.20(3) 0.10(3) 0.01(3) -0.06(4)
C104 0.262(17) 0.20(2) 0.16(2) 0.01(2) 0.04(2) 0.08(2)
C105 0.243(18) 0.36(4) 0.27(3) -0.12(3) 0.04(2) 0.05(2)
C106 0.23(3) 0.41(4) 0.25(4) -0.12(3) 0.01(3) 0.08(3)
C107 0.25(3) 0.31(4) 0.32(4) -0.10(3) -0.03(3) 0.06(3)
C108 0.24(3) 0.22(2) 0.15(3) -0.015(14) -0.01(2) -0.07(2)
C109 0.23(3) 0.26(2) 0.27(3) 0.08(2) -0.04(3) -0.06(2)
C110 0.19(3) 0.24(2) 0.24(3) 0.04(2) -0.03(2) -0.024(17)
C111 0.16(3) 0.29(3) 0.19(3) 0.06(3) -0.04(3) 0.01(2)
N60 0.060(6) 0.088(6) 0.080(7) 0.007(6) -0.015(5) 0.010(6)
N77 0.126(9) 0.038(6) 0.137(9) 0.000(5) 0.006(8) -0.007(5)
N94 0.150(9) 0.189(15) 0.074(9) -0.030(9) -0.034(10) -0.012(11)
O11 0.054(4) 0.044(4) 0.045(4) -0.006(3) 0.005(3) 0.001(3)
O12 0.050(4) 0.047(4) 0.053(4) -0.005(3) -0.006(3) 0.005(3)
O13 0.064(5) 0.045(4) 0.049(4) 0.003(3) -0.006(4) 0.007(3)
O14 0.091(7) 0.083(7) 0.063(5) 0.000(4) -0.011(5) 0.015(6)
O15 0.060(5) 0.064(4) 0.063(5) 0.008(4) -0.012(4) 0.017(4)
O16 0.088(7) 0.063(5) 0.085(7) -0.007(4) -0.013(6) 0.013(5)
O17 0.067(5) 0.049(4) 0.088(5) -0.015(4) -0.003(4) 0.016(4)
O18 0.109(8) 0.077(6) 0.091(7) -0.029(5) -0.018(6) 0.035(6)
O19 0.073(5) 0.078(5) 0.062(5) -0.014(4) -0.008(4) 0.012(4)
O20 0.118(9) 0.106(8) 0.062(5) -0.013(5) -0.021(5) 0.037(6)
O21 0.095(6) 0.068(5) 0.057(5) 0.001(4) -0.016(4) 0.029(4)
O22 0.123(8) 0.057(5) 0.067(7) 0.008(4) -0.013(6) 0.022(5)
O23 0.080(6) 0.045(4) 0.062(4) 0.001(3) 0.005(4) 0.008(4)
O24 0.116(8) 0.051(5) 0.071(6) -0.009(4) 0.002(6) 0.009(5)
O25 0.081(5) 0.058(4) 0.053(5) -0.012(3) -0.002(4) 0.005(4)
O26 0.045(3) 0.044(4) 0.058(4) -0.004(3) -0.002(3) 0.001(3)
O27 0.071(4) 0.057(5) 0.060(5) 0.013(4) 0.006(4) 0.008(4)
O28 0.072(4) 0.051(5) 0.080(6) 0.008(4) 0.000(4) 0.003(4)
O29 0.077(4) 0.053(5) 0.078(6) -0.016(4) -0.015(4) 0.007(4)
O30 0.062(5) 0.065(5) 0.075(5) -0.018(4) -0.024(4) 0.020(4)
O31 0.057(4) 0.063(5) 0.071(5) -0.003(4) -0.009(4) 0.022(4)
O32 0.070(4) 0.054(4) 0.055(5) -0.002(4) 0.012(4) 0.012(3)
O33 0.088(7) 0.083(7) 0.122(8) 0.026(6) 0.025(6) -0.016(5)
O34 0.059(5) 0.055(5) 0.116(5) -0.006(4) 0.005(4) -0.010(4)
O35 0.079(6) 0.100(8) 0.131(9) -0.035(7) -0.013(7) -0.010(6)
O36 0.056(5) 0.081(5) 0.102(6) -0.006(5) -0.007(4) 0.007(4)
O37 0.058(5) 0.089(7) 0.130(10) -0.009(6) 0.017(5) 0.007(5)
O38 0.062(5) 0.074(5) 0.078(6) -0.005(4) 0.017(4) -0.007(4)
O39 0.069(5) 0.085(5) 0.065(6) -0.011(4) -0.016(4) -0.002(4)
O40 0.058(4) 0.068(5) 0.083(5) -0.011(4) -0.002(4) 0.018(4)
O41 0.074(4) 0.082(6) 0.079(6) -0.013(5) 0.009(4) 0.023(4)
O42 0.089(4) 0.052(5) 0.077(7) -0.005(4) -0.005(4) -0.015(4)
O43 0.114(6) 0.056(5) 0.061(5) 0.013(4) 0.007(5) 0.003(4)
O44 0.097(6) 0.086(5) 0.053(5) -0.001(4) 0.012(4) 0.020(4)
O45 0.065(6) 0.095(4) 0.097(8) 0.003(5) 0.015(6) -0.007(4)
O46 0.090(6) 0.089(7) 0.091(7) 0.000(5) 0.016(5) -0.009(5)
O47 0.080(7) 0.093(7) 0.097(5) -0.005(5) 0.004(5) -0.026(6)
Si48 0.074(3) 0.073(3) 0.093(3) -0.009(2) -0.001(2) -0.023(2)
Si49 0.057(2) 0.082(3) 0.080(3) -0.007(2) 0.010(2) 0.006(2)
Si50 0.101(3) 0.078(3) 0.071(3) 0.017(2) 0.018(2) 0.002(2)
Si51 0.064(2) 0.088(3) 0.096(3) 0.005(3) 0.015(2) -0.020(2)
P10 0.0359(13) 0.0332(13) 0.0412(15) -0.0009(12) -0.0015(12) 0.0022
(12)
W1 0.0623(4) 0.0569(3) 0.0523(4) 0.0010(3) -0.0074(3) 0.0047(3)

```
W2 0.0578(3) 0.0489(3) 0.0727(4) 0.0005(3) -0.0051(3) 0.0107(3)
W3 0.0670(4) 0.0579(4) 0.0688(4) -0.0181(3) -0.0059(3) 0.0134(3)
W4 0.0844(5) 0.0723(4) 0.0489(4) -0.0091(3) -0.0080(4) 0.0209(4)
W5 0.0845(5) 0.0482(3) 0.0550(4) 0.0022(3) -0.0035(3) 0.0164(3)
W6 0.0767(4) 0.0433(3) 0.0536(4) -0.0055(3) -0.0025(3) 0.0057(3)
W7 0.0493(3) 0.0640(4) 0.0789(5) -0.0021(4) 0.0062(3) 0.0090(3)
W8 0.0577(4) 0.0526(3) 0.0822(5) 0.0109(4) 0.0083(4) -0.0062(3)
W9 0.0519(3) 0.0675(4) 0.0916(5) -0.0182(4) -0.0114(4) -0.0056(3)

_geom_special_details
;
 All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s.
planes)
 are estimated using the full covariance matrix.  The cell esds are
taken
 into account individually in the estimation of esds in distances,
angles
 and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are
only
 used when they are defined by crystal symmetry.  An approximate
(isotropic)
 treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s.
planes.
;

loop_
 _geom_bond_atom_site_label_1
 _geom_bond_atom_site_label_2
 _geom_bond_distance
 _geom_bond_site_symmetry_2
 _geom_bond_publ_flag
C52 C53 1.308(19) . ?
C52 Si48 1.852(19) . ?
C54 C55 1.32(3) . ?
C54 Si49 1.864(17) . ?
C56 C57 1.262(18) . ?
C56 Si50 1.79(2) . ?
C58 C59 1.04(4) . ?
C58 Si51 1.824(19) . ?
C61 N60 1.47(2) . ?
C61 C62 1.59(3) . ?
C62 C63 1.51(3) . ?
C63 C64 1.513(19) . ?
C65 C66 1.46(3) . ?
C65 N60 1.52(2) . ?
C66 C67 1.556(17) . ?
C67 C68 1.504(19) . ?
C69 C70 1.49(3) . ?
C69 N60 1.52(2) . ?
C70 C71 1.52(3) . ?
C71 C72 1.514(18) . ?
C73 N60 1.54(2) . ?
C73 C74 1.543(17) . ?
C74 C75 1.551(17) . ?
C75 C76 1.525(18) . ?
C78 C79 1.519(16) . ?
C78 N77 1.55(2) . ?
C79 C80 1.541(17) . ?
C80 C81 1.528(18) . ?
C82 N77 1.50(3) . ?
C82 C83 1.53(3) . ?
C83 C84 1.556(18) . ?
C84 C85 1.539(19) . ?
C86 N77 1.49(2) . ?
C86 C87 1.54(3) . ?
C87 C88 1.522(18) . ?
```

C88 C89 1.502(19) . ?
C90 N77 1.52(3) . ?
C90 C91 1.57(3) . ?
C91 C92 1.495(18) . ?
C92 C93 1.518(19) . ?
C95 N94 1.52(3) . ?
C95 C96 1.541(19) . ?
C96 C97 1.524(19) . ?
C97 C98 1.527(19) . ?
C99 N94 1.48(3) . ?
C99 C100 1.510(19) . ?
C100 C103 1.587(19) . ?
C102 C103 1.516(19) . ?
C104 C105 1.38(5) . ?
C104 N94 1.45(3) . ?
C105 C106 1.527(19) . ?
C106 C107 1.537(19) . ?
C108 C109 1.494(19) . ?
C108 N94 1.57(3) . ?
C109 C110 1.529(18) . ?
C110 C111 1.493(19) . ?
O11 P10 1.505(9) . ?
O11 W1 2.360(9) . ?
O11 W6 2.369(8) . ?
O12 P10 1.508(8) . ?
O12 W3 2.386(8) . ?
O12 W2 2.386(8) . ?
O13 P10 1.521(9) . ?
O13 W4 2.347(9) . ?
O13 W5 2.379(8) . ?
O14 W1 1.691(10) . ?
O15 W1 1.895(9) . ?
O15 W2 1.904(10) . ?
O16 W2 1.682(10) . ?
O17 W3 1.911(10) . ?
O17 W2 1.909(10) . ?
O18 W3 1.687(11) . ?
O19 W4 1.887(10) . ?
O19 W3 1.923(11) . ?
O20 W4 1.699(11) . ?
O21 W4 1.926(9) . ?
O21 W5 1.939(10) . ?
O22 W5 1.712(10) . ?
O23 W6 1.909(10) . ?
O23 W5 1.913(10) . ?
O24 W6 1.674(10) . ?
O25 W6 1.918(10) . ?
O25 W1 1.927(9) . ?
O26 P10 1.572(9) . ?
O26 W9 2.365(8) . ?
O26 W7 2.386(8) . ?
O26 W8 2.395(8) . ?
O27 W8 1.908(10) . ?
O27 W1 1.912(10) . ?
O28 W2 1.908(10) . ?
O28 W8 1.918(10) . ?
O29 W3 1.881(11) . ?
O29 W9 1.931(10) . ?
O30 W9 1.898(11) . ?
O30 W4 1.935(11) . ?
O31 W5 1.888(10) . ?
O31 W7 1.938(10) . ?
O32 W6 1.885(9) . ?
O32 W7 1.927(10) . ?
O33 W8 1.684(11) . ?
O34 W8 1.895(11) . ?

```
O34 W9 1.930(12) . ?
O35 W9 1.701(11) . ?
O36 W7 1.919(11) . ?
O36 W9 1.928(11) . ?
O37 W7 1.710(10) . ?
O38 W8 1.927(10) . ?
O38 W7 1.931(11) . ?
O39 Si48 1.624(12) . ?
O39 W1 1.932(10) . ?
O40 Si49 1.643(12) . ?
O40 W2 1.922(10) . ?
O41 Si49 1.630(12) . ?
O41 W3 1.913(11) . ?
O42 Si48 1.619(12) . ?
O42 W6 1.949(10) . ?
O43 Si50 1.637(12) . ?
O43 W5 1.927(11) . ?
O44 Si50 1.645(13) . ?
O44 W4 1.912(12) . ?
O45 Si49 1.576(12) . ?
O45 Si51 1.644(12) . ?
O46 Si50 1.582(13) . ?
O46 Si51 1.617(13) . ?
O47 Si48 1.609(13) . ?
O47 Si51 1.628(13) . ?

loop_
 _geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle
 _geom_angle_site_symmetry_1
 _geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
C53 C52 Si48 128(3) . . ?
C55 C54 Si49 125(2) . . ?
C57 C56 Si50 147(3) . . ?
C59 C58 Si51 138(4) . . ?
N60 C61 C62 115.5(15) . . ?
C63 C62 C61 115(2) . . ?
C62 C63 C64 111(2) . . ?
C66 C65 N60 115.5(15) . . ?
C65 C66 C67 109(2) . . ?
C68 C67 C66 108.2(17) . . ?
C70 C69 N60 115.3(14) . . ?
C69 C70 C71 111.5(18) . . ?
C72 C71 C70 111(2) . . ?
N60 C73 C74 113.4(13) . . ?
C73 C74 C75 105.7(14) . . ?
C76 C75 C74 107.1(15) . . ?
C79 C78 N77 117.5(14) . . ?
C78 C79 C80 107.9(14) . . ?
C81 C80 C79 116(3) . . ?
N77 C82 C83 117.3(14) . . ?
C82 C83 C84 111(2) . . ?
C85 C84 C83 107(3) . . ?
N77 C86 C87 114.9(14) . . ?
C88 C87 C86 114.1(18) . . ?
C89 C88 C87 112(3) . . ?
N77 C90 C91 113.8(14) . . ?
C92 C91 C90 119(2) . . ?
C91 C92 C93 111.1(19) . . ?
N94 C95 C96 117(2) . . ?
C97 C96 C95 108.7(18) . . ?
C96 C97 C98 108.7(18) . . ?
N94 C99 C100 125(2) . . ?
```

```
C99 C100 C103 104.6(17) . . ?
C102 C103 C100 104.6(17) . . ?
C105 C104 N94 121(4) . . ?
C104 C105 C106 117(3) . . ?
C105 C106 C107 116(4) . . ?
C109 C108 N94 108(3) . . ?
C108 C109 C110 110(3) . . ?
C111 C110 C109 109.8(18) . . ?
C61 N60 C69 106.7(12) . . ?
C61 N60 C65 111.4(14) . . ?
C69 N60 C65 109.9(13) . . ?
C61 N60 C73 111.5(14) . . ?
C69 N60 C73 111.0(15) . . ?
C65 N60 C73 106.4(13) . . ?
C82 N77 C86 112.4(18) . . ?
C82 N77 C90 107.2(13) . . ?
C86 N77 C90 114.2(17) . . ?
C82 N77 C78 109.6(17) . . ?
C86 N77 C78 103.6(11) . . ?
C90 N77 C78 109.7(17) . . ?
C104 N94 C99 114(3) . . ?
C104 N94 C95 104(2) . . ?
C99 N94 C95 109(2) . . ?
C104 N94 C108 111(3) . . ?
C99 N94 C108 92.9(18) . . ?
C95 N94 C108 126(3) . . ?
P10 O11 W1 128.7(4) . . ?
P10 O11 W6 128.3(5) . . ?
W1 O11 W6 90.4(3) . . ?
P10 O12 W3 128.6(5) . . ?
P10 O12 W2 128.6(5) . . ?
W3 O12 W2 89.3(3) . . ?
P10 O13 W4 128.8(5) . . ?
P10 O13 W5 127.8(5) . . ?
W4 O13 W5 90.6(3) . . ?
W1 O15 W2 148.6(5) . . ?
W3 O17 W2 122.7(5) . . ?
W4 O19 W3 149.5(6) . . ?
W4 O21 W5 120.7(5) . . ?
W6 O23 W5 148.4(5) . . ?
W6 O25 W1 121.5(5) . . ?
P10 O26 W9 125.6(5) . . ?
P10 O26 W7 124.7(4) . . ?
W9 O26 W7 91.2(3) . . ?
P10 O26 W8 123.8(4) . . ?
W9 O26 W8 91.0(3) . . ?
W7 O26 W8 90.2(3) . . ?
W8 O27 W1 151.9(5) . . ?
W2 O28 W8 151.2(5) . . ?
W3 O29 W9 152.6(5) . . ?
W9 O30 W4 150.0(5) . . ?
W5 O31 W7 150.7(5) . . ?
W6 O32 W7 152.0(5) . . ?
W8 O34 W9 125.2(5) . . ?
W7 O36 W9 123.9(5) . . ?
W8 O38 W7 122.8(5) . . ?
Si48 O39 W1 133.0(6) . . ?
Si49 O40 W2 133.0(6) . . ?
Si49 O41 W3 134.1(7) . . ?
Si48 O42 W6 133.3(6) . . ?
Si50 O43 W5 133.1(6) . . ?
Si50 O44 W4 133.4(6) . . ?
Si49 O45 Si51 178.3(8) . . ?
Si50 O46 Si51 175.3(8) . . ?
Si48 O47 Si51 171.7(8) . . ?
O47 Si48 O42 110.9(7) . . ?
```

```
O47 Si48 O39 112.2(6) . . ?
O42 Si48 O39 109.4(6) . . ?
O47 Si48 C52 108.1(9) . . ?
O42 Si48 C52 106.7(8) . . ?
O39 Si48 C52 109.4(9) . . ?
O45 Si49 O41 111.5(6) . . ?
O45 Si49 O40 110.0(6) . . ?
O41 Si49 O40 108.1(6) . . ?
O45 Si49 C54 109.6(9) . . ?
O41 Si49 C54 110.4(8) . . ?
O40 Si49 C54 107.1(9) . . ?
O46 Si50 O43 111.3(6) . . ?
O46 Si50 O44 111.3(6) . . ?
O43 Si50 O44 108.2(6) . . ?
O46 Si50 C56 104.8(11) . . ?
O43 Si50 C56 111.2(10) . . ?
O44 Si50 C56 110.0(9) . . ?
O46 Si51 O47 109.4(7) . . ?
O46 Si51 O45 111.9(7) . . ?
O47 Si51 O45 109.2(7) . . ?
O46 Si51 C58 108.4(9) . . ?
O47 Si51 C58 107.9(11) . . ?
O45 Si51 C58 110.0(10) . . ?
O11 P10 O12 111.4(5) . . ?
O11 P10 O13 112.4(5) . . ?
O12 P10 O13 111.5(5) . . ?
O11 P10 O26 107.8(5) . . ?
O12 P10 O26 107.2(5) . . ?
O13 P10 O26 106.2(5) . . ?
O14 W1 O15 101.1(5) . . ?
O14 W1 O27 100.1(5) . . ?
O15 W1 O27 86.8(4) . . ?
O14 W1 O25 100.0(5) . . ?
O15 W1 O25 158.9(4) . . ?
O27 W1 O25 89.0(4) . . ?
O14 W1 O39 98.8(5) . . ?
O15 W1 O39 89.6(4) . . ?
O27 W1 O39 161.1(4) . . ?
O25 W1 O39 87.7(4) . . ?
O14 W1 O11 173.4(4) . . ?
O15 W1 O11 85.2(3) . . ?
O27 W1 O11 82.2(3) . . ?
O25 W1 O11 73.8(3) . . ?
O39 W1 O11 79.0(4) . . ?
O16 W2 O15 101.4(5) . . ?
O16 W2 O17 100.7(5) . . ?
O15 W2 O17 157.8(4) . . ?
O16 W2 O28 99.8(5) . . ?
O15 W2 O28 87.7(4) . . ?
O17 W2 O28 87.5(4) . . ?
O16 W2 O40 100.7(5) . . ?
O15 W2 O40 88.7(4) . . ?
O17 W2 O40 88.4(4) . . ?
O28 W2 O40 159.5(4) . . ?
O16 W2 O12 174.3(4) . . ?
O15 W2 O12 84.1(3) . . ?
O17 W2 O12 73.8(3) . . ?
O28 W2 O12 81.5(3) . . ?
O40 W2 O12 78.0(4) . . ?
O18 W3 O29 100.0(5) . . ?
O18 W3 O17 100.8(5) . . ?
O29 W3 O17 89.1(4) . . ?
O18 W3 O41 100.4(5) . . ?
O29 W3 O41 159.6(4) . . ?
O17 W3 O41 87.7(5) . . ?
O18 W3 O19 101.8(5) . . ?
```

```
O29 W3 O19 86.2(4) . . ?
O17 W3 O19 157.4(4) . . ?
O41 W3 O19 89.1(5) . . ?
O18 W3 O12 174.3(4) . . ?
O29 W3 O12 81.8(3) . . ?
O17 W3 O12 73.7(3) . . ?
O41 W3 O12 78.0(4) . . ?
O19 W3 O12 83.7(4) . . ?
O20 W4 O19 101.9(5) . . ?
O20 W4 O44 99.4(6) . . ?
O19 W4 O44 90.6(5) . . ?
O20 W4 O21 98.4(5) . . ?
O19 W4 O21 159.7(4) . . ?
O44 W4 O21 87.8(5) . . ?
O20 W4 O30 99.6(6) . . ?
O19 W4 O30 87.0(4) . . ?
O44 W4 O30 160.9(4) . . ?
O21 W4 O30 88.0(4) . . ?
O20 W4 O13 172.7(4) . . ?
O19 W4 O13 85.2(4) . . ?
O44 W4 O13 78.4(4) . . ?
O21 W4 O13 74.6(3) . . ?
O30 W4 O13 82.5(3) . . ?
O22 W5 O31 99.8(5) . . ?
O22 W5 O23 101.5(4) . . ?
O31 W5 O23 87.2(4) . . ?
O22 W5 O43 99.4(5) . . ?
O31 W5 O43 160.9(4) . . ?
O23 W5 O43 88.9(5) . . ?
O22 W5 O21 99.8(4) . . ?
O31 W5 O21 89.5(4) . . ?
O23 W5 O21 158.8(4) . . ?
O43 W5 O21 87.4(5) . . ?
O22 W5 O13 173.0(4) . . ?
O31 W5 O13 82.6(3) . . ?
O23 W5 O13 85.1(3) . . ?
O43 W5 O13 78.4(4) . . ?
O21 W5 O13 73.7(3) . . ?
O24 W6 O32 100.2(5) . . ?
O24 W6 O23 101.4(5) . . ?
O32 W6 O23 86.7(4) . . ?
O24 W6 O25 99.3(5) . . ?
O32 W6 O25 88.3(4) . . ?
O23 W6 O25 159.3(4) . . ?
O24 W6 O42 100.6(5) . . ?
O32 W6 O42 159.2(4) . . ?
O23 W6 O42 89.2(4) . . ?
O25 W6 O42 88.4(4) . . ?
O24 W6 O11 172.7(4) . . ?
O32 W6 O11 81.8(3) . . ?
O23 W6 O11 85.7(3) . . ?
O25 W6 O11 73.7(3) . . ?
O42 W6 O11 77.6(3) . . ?
O37 W7 O36 100.5(5) . . ?
O37 W7 O32 103.3(5) . . ?
O36 W7 O32 156.1(4) . . ?
O37 W7 O38 100.4(5) . . ?
O36 W7 O38 88.0(5) . . ?
O32 W7 O38 89.7(4) . . ?
O37 W7 O31 102.2(5) . . ?
O36 W7 O31 88.4(5) . . ?
O32 W7 O31 84.7(4) . . ?
O38 W7 O31 157.4(4) . . ?
O37 W7 O26 170.5(4) . . ?
O36 W7 O26 72.2(4) . . ?
O32 W7 O26 84.3(3) . . ?
```

```
O38 W7 O26 73.6(3) . . ?
O31 W7 O26 84.1(3) . . ?
O33 W8 O34 100.7(6) . . ?
O33 W8 O27 103.0(6) . . ?
O34 W8 O27 156.2(4) . . ?
O33 W8 O28 101.4(5) . . ?
O34 W8 O28 88.5(4) . . ?
O27 W8 O28 84.2(4) . . ?
O33 W8 O38 101.1(5) . . ?
O34 W8 O38 88.3(4) . . ?
O27 W8 O38 89.9(4) . . ?
O28 W8 O38 157.5(4) . . ?
O33 W8 O26 170.5(5) . . ?
O34 W8 O26 71.8(4) . . ?
O27 W8 O26 85.0(3) . . ?
O28 W8 O26 84.4(3) . . ?
O38 W8 O26 73.4(4) . . ?
O35 W9 O30 102.3(6) . . ?
O35 W9 O36 99.3(5) . . ?
O30 W9 O36 89.8(4) . . ?
O35 W9 O34 101.1(6) . . ?
O30 W9 O34 156.5(4) . . ?
O36 W9 O34 87.6(5) . . ?
O35 W9 O29 104.4(5) . . ?
O30 W9 O29 84.7(4) . . ?
O36 W9 O29 156.2(4) . . ?
O34 W9 O29 88.3(4) . . ?
O35 W9 O26 169.2(5) . . ?
O30 W9 O26 85.0(3) . . ?
O36 W9 O26 72.6(4) . . ?
O34 W9 O26 71.9(3) . . ?
O29 W9 O26 83.9(3) . . ?

_diffrn_measured_fraction_theta_max    0.983
_diffrn_reflns_theta_full              70.41
_diffrn_measured_fraction_theta_full   0.983
_refine_diff_density_max    1.030
_refine_diff_density_min   -0.992
_refine_diff_density_rms    0.164
```